

群積による格子構造の超並列固有値解析

大阪大学大学院 学生会員 ○小笹山 翔
 広島大学大学院 学生会員 吉田 啓悟
 広島大学大学院 正会員 有尾 一郎

1. はじめに

計算科学の研究が発展する中で、量子力学に基づく計算理論¹⁾は、新たな産業基盤として期待されている。コンピュータを用いて連続体力学の数値解を求める場合、離散化要素のメッシュ分割などの多自由度の有限要素法を利用する。この際に、離散化メッシュの自由度の増加に伴って行列計算を必要とするが、行列サイズ・計算時間ともに加速度的に増す。そしてこの行列計算の過程では全体行列をそのまま計算し、「0成分」を多く含む部分に関してもそのまま計算されている。また、有尾・隅田²⁾による群論を用いたブロック対角化(BD)は、周期格子構造の隠れた対称性の解明として格子構造並列解析の理論を発表している。本研究では量子科学計算用のJuliaを用いて、群積に基づくBDアルゴリズムによる並列固有値解析の計算効率の法則性を調べた。

2. Z_2 群積を用いたブロック対角化理論

本研究ではFEM解析に鏡映変換と回転変換を利用する。対称性を有する解析対象において群対称性を用い、対称変換操作をすることで剛性行列のBDを考える。また、対角化できた場合、対角ブロック成分のみに対し、計算を行うことが可能である。本研究では現在「 2^n 」の節点数を持ち、対称性を有する構造物に対して、計算原理の適用、節点数の拡張へと進めている。

3. 仮想仕事の原理と対称変換

仮想仕事の原理において群対称変換操作 $g_i \in G$ を導入し仮想変位の対称性を考える。仮想変位を対称変換し、その変分を群論の既約な基底空間表現で考える。群積を用いることで周期格子の離散化要素の対称変換表現を利用する。これらの変換則をひずみ行列や剛性行列の組立に適用する。これにより群 G 作用下の変位の変分 δu_e に対するポテンシャルエネルギー $\delta \Pi$ は次のように組み込められる。

この対称変換操作の原理を振動方程式に適用する。多自

Table 1 Analysis conditions

変数	変数説明	与値
α	係数	26
β	係数	9
$\frac{\gamma A \ell}{g}$	質量行列の係数	1
k_a	水平方向部材の剛性	1
k_b	鉛直方向部材の剛性	1

由度系非減衰自由振動方程式 $M\ddot{x}(t) + Kx(t) = 0$ から固有値計算を行う。その際の剛性行列 K 、質量行列 M は次のようである。本研究では Fig. 1 に示す周期境界を有する $2^i \times 2^j$ 格子モデルを扱う。解析条件を Table 1 に示す。周期境界条件を有する $2^i \times 2^j$ 格子モデルの節点数の2倍増加に伴う固有値解の分布の推移、解の予測に着目する。

(1) 群論的仮想変位を用いた剛性行列の対角化

2つの節点の仮想変位 $\delta u_e = \{\delta u_i, \delta u_j\}^T$ における対称性を考える。Fig. 2(a) に示すトラスの初期節点変位から対称性を持つ仮想節点変位の関係を

$$\delta w_e = H^T \delta u_e = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta u_i \\ \delta u_j \end{Bmatrix} \quad (1)$$

とする。群作用下の節点変位の変分 δu_e に対するポテンシャルエネルギー $\delta \Pi_e(G)$ は次式のように誘導できる。

$$\begin{aligned} \delta \Pi_e(G) &= \int_{V_e} \delta \varepsilon^T \sigma dV_e - \delta u_e^T f_e \\ &= \int_{V_e} \delta \varepsilon^T E \varepsilon dV_e - \delta u_e^T f_e \\ &= \int_{V_e} \delta u_e^T B^T E B u dV_e - \delta u_e^T f_e \\ &= (\delta u_e^T H) \int_{V_e} (B H)^T E B H dV_e (H^T u_e) \\ &\quad - (\delta u_e^T H) H^T f_e \\ &= \delta w_e^T \int_{V_e} (B H)^T E B H dV_e w_e - (\delta w_e)^T H^T f_e \\ &= \delta w_e^T \left(\int_{V_e} \tilde{B}^T E \tilde{B} dV_e w_e - H^T f_e \right) \\ &= \delta w_e^T \left(\tilde{K}_e w_e - H^T f_e \right) \end{aligned}$$

キーワード 量子アルゴリズム, 量子力学, 群のテンソル積, ブロック対角化法, 並列計算原理

連絡先 〒739-8527 広島県市鏡山 1-4-1 広島大学大学院工学研究科社会基盤環境工学専攻 TEL082-424-7792

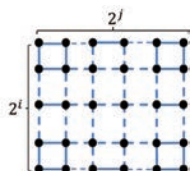


Fig. 1 Lattice models

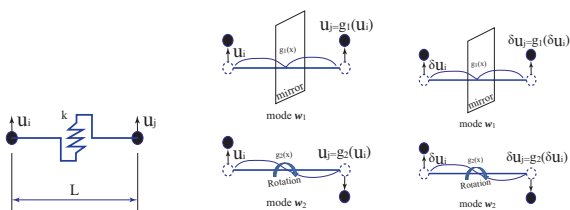
(a) FEM Elements (b) Mode w_i (c) Virtual δw_i

Fig. 2 FEM model between two nodes(1 degree of freedom/1 node)

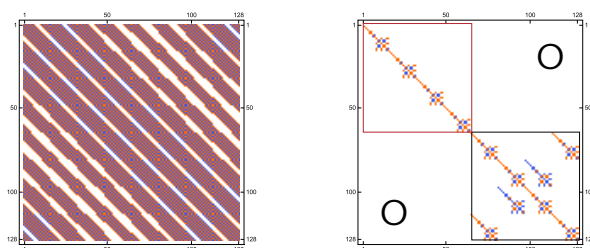
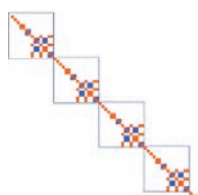
(a) Matrix $2^3 \times 2^4: M^{-1}K$ (b) $2^3 \times 2^4: H_{2n}^T M^{-1}K H_{2n}$ Fig. 3 $M^{-1}K$ to BDM image

Fig. 4 Enlarged view of block diagonalization

4. 数値結果

本研究では Fig. 1 のような対称格子系モデルの固有値計算を (1) 直接計算 $M^{-1}K$ (Fig. 3(a)), (2) ブロック対角化変換利用 $H_{2n}^T M^{-1}K H_{2n}$ (Fig. 3(b), Fig. 4) による計算において数値科学計算プログラム julia 1.8³⁾を用いて, FEM による固有値解を求めた. そして, 固有値解の予測に着目した. 解の予測として $2^3 \times 2^3$ 格子モデルの固有値を基準とする増分を Table 2 にまとめた. 今回, 最大重複度となった $\lambda_n = 2.69230$ 以外の解の重複度は一致した. $2^i \times 2^j$ 対称格子モデルの 2 倍増加に対して重複固有値の推定, 確認もされた. その結果を Table 2 に示す.

5. 考察

Table 2 より最大 ρ となる $\lambda = 2.69230(\text{Hz}^2)$ 以外の $2^3 \times 2^3$ 格子モデルの固有値の ρ はその後の 2 倍増加モデルに対しても同様であった. そして $\lambda = 2.69230(\text{Hz}^2)$ の ρ に

Table 2 Increments with respect to the eigenvalues of the $2^3 \times 2^3$ lattice model

λ_n	$2^3 \times 2^3$	$2^3 \times 2^4$	$2^4 \times 2^4$	$2^4 \times 2^5$	$2^5 \times 2^5$
8.23529	1	1	1	1	1
7.08312	4	4	4	4	4
6.08562	4	4	4	4	4
4.88372	4	4	4	4	4
4.15236	8	8	8	8	8
3.25141	4	4	4	4	4
2.69230	14	14	30	30	62
2.18715	4	4	4	4	4
1.55065	8	8	8	8	8
1.14754	4	4	4	4	4
0.63349	4	4	4	4	4
0.30435	4	4	4	4	4
≈ 0	1	1	1	1	1
合計	64	64	80	80	112

関して次の式で得られることが分かった.

$$\rho = 2^{n+1} - 2 \quad (2)$$

ただし, $n = \min(i, j)$ for $2^i \times 2^j$, である. また, BD 変換後の行列成分において, 特定の固有値の抽出を考えた. その中で, 今回は最大固有値の分布に特徴が表れ, 本研究の格子系モデルに関する最大固有値の得られる成分を一般化すると次のようになった.

$$(\text{行列成分}): (2^k + 2, 2^k + 2) \quad (3)$$

ただし, $k = \max(i, j)$ for $2^i \times 2^j$, である. これらの結果から, 全固有値解析を施すことなく, 解の予測が一部可能となった.

6. 結語・今後の課題

1. 多自由度の 2 倍増加格子モデルに関して, $2^3 \times 2^3$ を基準とする増分の予測, 最大固有値の得られるブロックの特定, BD 変換の一部の形状予測を一般化することが可能となった.
2. Z_2 群による BD 変換の特性から重複度の予測と固有値解析前における重解の予測が可能となった.
3. 構造工学や固体力学分野で必要とされることの多い, 最小固有値から任意の個数の固有値抽出計算を効率的な点として考えられる.

参考文献

- 1) 株式会社日本総合研究所 先端技術ラボ: 量子コンピュータの概説と動向 ~ 量子コンピューティング時代を見据えて ~, (2020)
- 2) 有尾一郎・隅田浩樹, 周期格子構造の隠れた対称性の解明, 日本建築学会, 構造工学論文集, Vol.47B (2001.3)
- 3) 数値科学計算プログラム julia1.8, (2022.8)